

МОДЕЛИРОВАНИЕ КООПЕРАТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ НА ГРАНИЦЕ БИМЕТАЛЛА Pt-Al ПРИ НАЛИЧИИ ДЕФЕКТОВ

Захаров П.В.¹, Старостенков М.Д.², Маркидонов А.В.³

¹АГАО имени В.М. Шукшина, Бийск,

²АлтГТУ им. И.И. Ползунова, Барнаул,

³КузГТУ им. Т.Ф. Горбачева, Новокузнецк

zakharovpvl@rambler.ru

Применение биметаллических соединений в технологических процессах и быту стимулирует интерес к данным материалам. Износостойкие и инструментальные биметаллы находят все большее применение в деталях машин, подвергающихся сильному изнашиванию [1]. В свою очередь, структура и особенности границ биметаллов на наноуровне при наличии различных дефектов остаются мало изучены. Это связано с естественными трудностями при проведении натуральных экспериментов на микро- и наноуровне материи.

В работах [2, 3] показано, что наличие межузельных атомов вблизи границы биметалла Ni-Al приводит к процессу массопереноса. При этом происходило, как диссипативное, так и консервативное движение дислокаций несоответствия. Кооперативные эффекты и другие процессы обсуждается в статьях [4 – 7], где он обусловлен наличием точечных дефектов: межузельных атомов и вакансий. Процессы, связанные с кооперативном поведением атомов, возникают при наличии ряда других дефектов: междоузлий, дефектов замещения и внедрения, дислокаций, дефектов упаковки, границ зерен и фаз [8].

Кристаллическая решетка моделировалась методом молекулярной динамики, атомы которой взаимодействовали посредством потенциала Морзе.

Эксперименты проводились с использованием программы [10]. Способ создания начальной конфигурации расчетной ячейки, как предложено в [9], включал три стадии: построение, первичная релаксация и охлаждение.

Граница между компонентами биметаллического сплава проходила через середину ячейки содержащей 3200 частиц (40×80 частиц). Ячейка представляла собой плоскость {111}. Выбор данной плоскости для исследования обусловлен тем, что диффузионные процессы, как правило, развиваются в плотноупакованных направлениях, которым соответствуют плоскости {111} в обычном ГЦК кристалле [9]. Граничные условия для расчетной ячейки задавались следующим образом: по оси x – периодические, по оси y – свободные. Начальная температура ячеек задавалась равной нулю Кельвин.

В ходе компьютерных экспериментов, установлено, что внедрение числа вакансий на стороне Pt, равного номеру ряда внедрения от границы биметалла, приводит к согласованным атомным смещениям, сопровождаемым диссипативным движением дислокации от границы биметалла. Такой эффект наблюдался вплоть до девятого ряда внедрения от границы.

Если внедрялось число вакансий меньше, чем номер ряда внедрения, то наблюдались кооперативные атомные смещения, приводящие к диссипативному движению дислокации от границы биметалла вплоть до ее выхода на поверхность. Данные атомные смещения имели место не далее седьмого ряда внедрения вакансий.

Внедрение единичных пар Френкеля на стороне Al, в зависимости от расстояния между межузельным атомом (МА) и вакансией, приводило либо к взаимодействию МА и ближайшей дислокации несоответствия, либо к аннигиляции пары МА – вакансия.

Процессы, возникающие при релаксации единичных дефектов и их комплексов вблизи границы биметалла Pt-Al, могут оказывать существенное влияние на структуру и свойства наночастиц сплава, что, в свою очередь, может использоваться при конструировании новых композиционных и других материалов.

Литература

1. Быков А.А. Развитие производства биметаллов. // Металлург: научно-технический и производственный журнал. №9 2009 г. С. 61-65.
2. Захаров П.В., Старостенков М. Д., Медведев Н.Н., Маркидонов А.В., Обидина О.В. Кооперативное поведение межузельных атомов в поле дислокаций несоответствия на границе биметалла Ni-Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т. 9. № 4. С. 431-435.
3. Старостенков М.Д., Захаров П.В., Медведев Н.Н., Дёмина И.А., Попова Г.В. Исследование зависимости скорости массопереноса от расстояния между межузельным атомом и дислокацией несоответствия на модельной границе биметалла Ni-Al. // Вестник карагандинского университета, Серия ФИЗИКА №1 (65). 2012. С. 36-40. ISSN 0142-0843
4. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Потекаев А.И., Кулагина В.В. Высокоскоростной массоперенос в кристаллическом алюминии, содержащем цепочки вакансий и межузельных атомов // Изв. вузов. Физика. 2009. т.52. №9/2. С.139-145.
5. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Высокоскоростной массоперенос в двумерном кристалле никеля при наличии дислокационных петель различной локальной плотности // Изв. вузов. Черная металлургия. 2009. №6. С.57-60.

6. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Медведев Н.Н., Тихонова Т.А. Моделирование переноса массы в виде рядов вакансий и межузельных атомов // «Физика прочности и пластичности материалов». Тезисы докладов XVII международной конференции. Самара. 2009. С.37.
7. Старостенков М.Д., Холодова Н.Б., Кондратенко М.Б., Медведев Н.Н., Пожидаева О.В. Возникновение релаксационных волн смещений вблизи точечных дефектов в металлах с ГЦК решеткой. I. Волны смещений вблизи одиночных вакансий // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2008. Т. 5. №4. С. 117-120
8. Штремель, М.А. Прочность сплавов. Часть I. Дефекты решетки: Учебник для вузов. – М.: МИСИС, 1999. 384 с.
9. Полетаев Г.М. Исследование процессов взаимодиффузии в двумерной системе Ni–Al: Диссертация канд. физ.-мат. наук. Барнаул, 2002. 186 с.
10. Полетаев, Г.М. Моделирование методом молекулярной динамики структурно-энергетических превращений в двумерных металлах и сплавах (MD2). Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2008610486 от 25.01.2008.